ボンド数が固定された膜モデルの１次相転移

茨城高専　　鯉渕 弘資 [1]，佐々木 嗣音，篠原 啓介

1 序論

Helfrich や Polyakov-Kleinert の膜モデルを３角形分割された球面上で離散化したものはボンド数が固定されている場合，crystalline 膜モデルとか tethered 膜モデルと呼ばれ，Monte Carlo 法等でその相構造に関し多くの研究がなされてきた [1]。このとき，Hamiltonian の離散化の仕方は一意的に決まるわけではないので，モデルの相構造は離散化 Hamiltonian に一般には依存する可能性がある。しかし，このような観点からの研究は現在までなされていないように思われる。

多くの数値的研究では，曲げエネルギーとして３角形の単位法線ベクトル $\mathbf{n}_i$ を用いた $1-\mathbf{n}_i\cdot\mathbf{n}_j$ の形のものが用いられている。その結果，膜の自己交差が許されている場合であるが，表面の状態の違いによる平滑相と乱雑相の間に２次相転移があるという報告がなされている [2]。これは理論的な結果 [3] と一致している。一方，１次相転移という理論的結果 [4] も知られている。Lennard-Jones ポテンシャルと $1-\mathbf{n}_i\cdot\mathbf{n}_j$ タイプの曲げエネルギーを一緒に用いた場合１次相転移になるという数値的研究結果 [5] もある。

そこで，本発表では，３角形の各頂点での法線ベクトルで定義された新しい曲げエネルギーの離散化を用いて定義したモデルに関する研究結果 [6] を説明する。

2 モデルと Monte Calro 法

曲げエネルギー S_2 の定義は

$$S_2=\sum_i\sum_{j(i)}\left[1-\mathbf{n}(i)\cdot\mathbf{n}_{j(i)}\right],\quad \mathbf{n}(i)=\frac{\mathbf{N}_i}{|\mathbf{N}_i|},\quad \mathbf{N}_i=\sum_{j(i)}\mathbf{n}_{j(i)}A_{\Delta_{j(i)}},\tag{1}$$

である。ここで，$\mathbf{n}(i)$ は頂点 i の単位法線ベクトル，$\mathbf{n}_{j(i)}$，$A_{\Delta_{j(i)}}$ は頂点 i のまわりの３角形 $j(i)$ の法線ベクトルとその面積である。この S_2 を用いた２種類のモデル（model 1 と model 2）を対象とする：

$$\text{(model 1)}\quad Z_1=\int\prod_{i=1}^{N}dX_i\exp[-(S_1+bS_2)],\quad S_1=\sum_{(ij)}(X_i-X_j)^2,\tag{2}$$

$$\text{(model 2)}\quad Z_2=\int\prod_{i=1}^{N}dX_i\exp[-(bS_2+V)],\quad V(|X_i-X_j|)=\begin{cases}0 & (0<|X_i-X_j|<r_0),\\ \infty & (\text{otherwise}).\end{cases}\tag{3}$$

[1] E-mail: koibuchi@mech.ibaraki-ct.ac.jp

ここで，S_1, V は Gaussian エネルギー，剛体壁ポテンシャルであり，$r_0=\sqrt{1.15}$ としている。model 1 (model 2) が表面張力を持つ（持たない）モデルである。

2.1 結果および結論

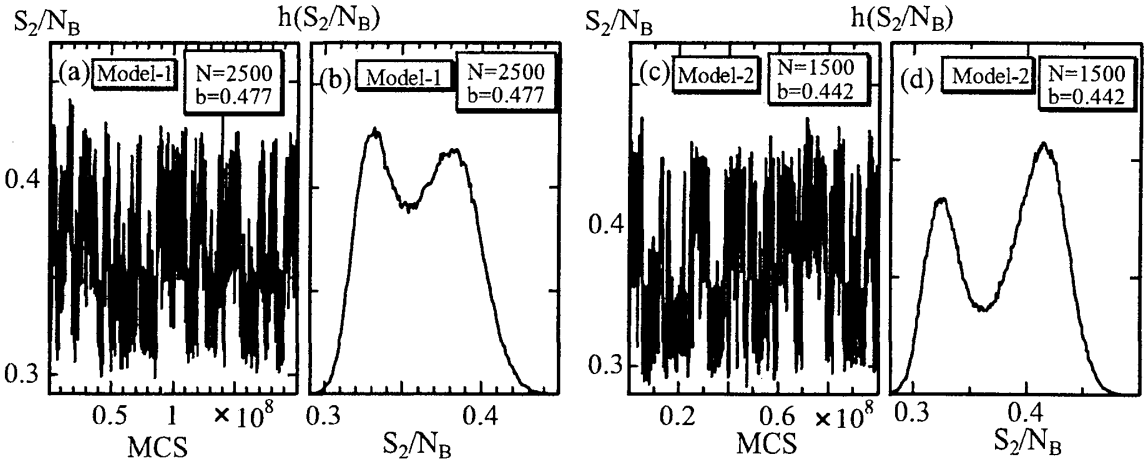

図 1: S_2/N_B とそのヒストグラム。N_B はボンドの総数。

図 1 に model 1 と model 2 の S_2/N_B とそのヒストグラムを示す。分子数はそれぞれ $N=2500$ と $N=1500$ である。Model 1 と model 2 ともに，ヒストグラムにピークが 2 つあり明らかに 1 次相転移であることがわかる。従って，通常の $1-\mathbf{n}_i\cdot\mathbf{n}_j$ タイプの曲げエネルギーの場合でも式 (1) の場合でも，いずれにせよ Helfrich の膜モデルは相転移をもつといえる。この発表は一部科研費（No.15560160）の補助を受けている。

参考文献

[1] F. David, in *Two dimensional quantum gravity and random surfaces*, edited by D. Nelson, T. Piran, and S. Weinberg (World Scientific, Singapore, 1989), Vol. 8, p.87.

[2] Y. Kantor, D.R. Nelson, Phys. Rev. A **36**, (1987), 4020.

[3] L. Peliti, S. Leibler, Phys. Rev. Lett. **54**, (1985), 1690;
F. David, E. Guitter, Europhys. Lett, **5**, (1988), 709.

[4] M. Paczuski, M. Kardar and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **60**, (1988), 2638.

[5] J-P. Kownacki and H. T. Diep, Phys. Rev. E **66**, (2002), 066105.

[6] H. Koibuchi, N. Kusano, A. Nidaira, K. Suzuki, and M. Yamada, Phys. Rev. E **69**, (2004), 066139.